Sherrington Kirkpatrickのスピングラス理論をめぐって(ランダムスピン系の相転移,研究会報告)

AUTHOR(S):

桂, 重俊

Sherrington Kirkpatrick のスピングラス理論をめぐって

東北大 工　桂　重俊

1. Sherrington Kirkpatrick の理論

Edwards Anderson が dilute magnetic alloy においてスピンが凍結したスピングラスが存在することを示した直後 Sherington Kirkpatrick は Solvable model of a spin glass という論文を発表した。exactly solvable と銘うってあるが根拠のあいまいな数学的処方を用いている為，物議をかもした。仮定と結論をまとめると，1) infinitely ranged exchange interaction 2) $S=\frac{1}{2}$ の Ising spin, $\mathscr{H}=-\sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j$, 3) exchange の分布は Gaussian $P(J_{ij})=(1/2\pi J^2)^{\frac{1}{2}} \exp[-(J_{ij}-J_0)^2/2J^2]$, 4) $\log Z = \lim_{n\to 0}(Z^n-1)/n$, の lim で状態和の対数を求める。5) n個の考えている系と同種の系（レプリカ）を考えて $Z^n=\prod_\alpha Z_\alpha$ を計算する。6) $J_0=\tilde{J}_0/N$, $J=\tilde{J}/\sqrt{N}$ のスケーリングを行う。7) $e^{\lambda a^2}=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\int dx \exp[-x^2/2+(2\lambda)^{\frac{1}{2}} ax]$ を用いて状態和を $n+\frac{n(n-1)}{2}$ 重の積分表示になおし鞍点法により積分を評価する。その結果，自由エネルギーFがスピンの平均値 $m=\langle\langle S_i\rangle\rangle_J$ とスピンの自乗の平均値 $q=\langle\langle S_i\rangle^2\rangle_J$ で表わされ m と q をきめる coupled equation が得られ，これからスピングラス転移点の存在，転移点における帯磁率，比熱のカスプが示された。

2. 他の方法で SK の結果を導くこと

SK 理論は根拠の不十分な数学的方法に基づいていたため，多くの人により他の方法でその結果または似た結果を導いたという論文を発表された Southern, Kaneyoshi, Morita-Horiguchi, Klein, Thouless-Anderson-Palmer, Chalupa, Southern and Young，等ここでは Klein の方法を紹介する。

前節 2) のハミルトニアン，3) の分布を考える。

$$H_i=\sum_j J_{ij}\langle S_j\rangle$$

とすれば，分子場理論によりスピンの平均値は

$$<S_i> = \int \Pi dJ_{ij} P(J_{ij}) dH_i \tanh(\beta H_i)$$
$$= \int dH_i \rho(H_i) \tanh(\beta H_i)$$

で与えられる。

分子場の分布 $\rho(H_i)$ を求めよう

$$\rho(H_i) = \int \Pi [dJ_{ij} P(J_{ij})] \ \delta(H_i - \sum_j J_{ij} <S_j>$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int d\rho_i \ e^{i\rho H_i} \prod_j \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \ e^{-i\rho J_{ij} <S_j>}$$

$\int dJ_{ij}$ を実行すると

$$= \frac{1}{2\pi} \int d\rho_i \ e^{i\rho(H_i - J_0 \Sigma <S_j>)} \prod_j^N e^{-\frac{\rho^2 J^2 <S_i>^2}{2}}$$

$\Sigma <S_j> \equiv Nm$ $\Sigma <S_i>^2 \equiv Nq$ により m ，q を定義し，前節6）のscalingを行うと

$$g(H_i) = \frac{1}{2\pi} \int d\rho \ e^{i\rho(H_i - \widetilde{J}_0 m) - \frac{\rho^2 \widetilde{J}^2 q}{2}}$$
$$= \left(\frac{1}{2\pi J^2 q}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(H_i - \widetilde{J}_0 m)^2}{2\widetilde{J}^2 q}\right]$$

これを（　）および $<S_i>^2$ に対する式に入れればSKの m ，q に対する式を再現する

3. SK理論の問題点

SK理論について最大の問題点はentropyが負になることであるがこの原因がモデルによるものか，方法論によるものか，本質的なことであるのかについて多くの討議がなされている。方法論の問題としては1）$n \to 0$ limitの根拠，2）$N \to \infty$ と $n \to 0$ のlimitの順位変更，3）saddle point法は適用条件をみたしているか，4）$n \to 0$ のanalytic continuationはuniqueか，5）free energy minimum となっているか，6）infinitely long ranged であることがおかしなことの原因になっているか，これらについての論のいくつかを紹介する。

Almeida and Thouless は1節の $\partial^2 g / \partial x^\alpha \partial x^\beta$, $\partial^2 g / \partial y^{(\alpha\beta)} \partial y^{(\gamma\delta)}$, $\partial^2 g / \partial x^\alpha \partial g^{(\gamma\delta)}$ から作られる $n(n+1)/2$ 次元の行列の固有値をexplicitに計算し，大部分の固有値は正であるが一つの固有値がスピングラス温度以下で負であることを見出し，鞍点法を適用限界外に適用したことがeutropy negative の原因としている。

Klein は $Z^n = Z^n_{sk} + Z' \sin 2\pi kn$ に対して $\lim \frac{1}{n}(Z^n - 1) = \log Z_{sk} - 2\pi k Z'$ となることから $n \to 0$ の analytic continuation が uniqueでないことを示した。

4. SK理論が infinitely long rangedであるのでこれをshort rangeにした場合どうなるか, nearest neighbor相互作用をするランダムボンドモデルをBethe近似で $-\beta\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{z} K_{ij}\sigma_i \sigma_j + C\sigma_i + \sum L_j \sigma_j$ を考える。このとき中心スピンの分布とまわりのスピンの分布が等しいことを要請するとeffective field分布関数 $g(l)$ $(l = \mathrm{th}\,L)$ について積分方程式

$$g(l'_i) = \int \delta(l'_i - \mathrm{th}\ [C + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq z}}^{z} \mathrm{th}^{-1} t_i l_j) \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq z}}^{z}{}' [P(J_j)\, g(l_j)\, dJ_j dl_j]$$

が成立ちこの積分方程式から $g(l_i)$ が求まればスピンの平均値およびモーメントは

$$\overline{\sigma^n} = \int \mathrm{th}^n\ [C + \sum_{j=1}^{z} \mathrm{th}^{-1} t_j l_j] \prod_{j=1}^{z} P(J_j)\, g(l_j)\, dJ_j dl_j$$

と求まる。(　)より 1) $\overline{\sigma} \neq 0$, $\overline{\sigma} \to 0$, 2) $\overline{\sigma^2} \neq 0$, $\overline{\sigma^2} \to 0$, 3) $\overline{\sigma^2} \neq 0$, $\overline{\sigma} \to 0$, を与えるところとして para-GLP の境界が $\overline{\mathrm{th}^2 K} = 1/(z-1)$, Para-ferro の境界かつ $\overline{\mathrm{th} K} = 1/(z-1)$, ferro-GLP の境界が $2/\overline{\mathrm{th} K} - 1/\overline{\mathrm{th}^2 K} = z - 1$ と求まる $P(J)$ として中心 J, 巾 $2\triangle$ の短形分布をとった場合のPhase boundaryはFig. のようになる。　$J = J_0/z$, $\triangle = \triangle_0/\sqrt{z}$ として $z \to \infty$ とすればBethe近似は分子場近似にtendし, 1) 2) のboundaryは SK のそれと一致する。 Katsura, Katsura-Fujiki. 分子場の範囲でnearest neighborの項 Z を有限とすると, 積分方程式

$$g(\sigma) = \int \delta(\sigma - \mathrm{th}(C + \sum^{z} K_i \sigma'_i) \prod_{j=1}^{z} P(J_i)\, g(\sigma')\, dJ_j\, d\sigma_j$$

となる。exchangeの分布 $P(J)$ をgauss分布で与え, スピンの分布 $g(\sigma)$ をFourier変換で求めることが猪苗氏により行われた。

5. SK理論におけるnegative entropyは何であるかについてThouless Anderson Palmerは高温展開級数のresummationを行い, 高温では SK理論と一致し, $T=0$ で $S=0$ を得ている。そしてAlmeida and Thouless はsaddle pointによる積分評価のとき負の固有値があることが $T=0$ の $S<0$ の原因だとしている。 Kirkpatrick の 4 sample 500 spins の Monte Carlo simulation では $T \to 0$ で TAP の entropyとよい一致を示している。これは SK の悪い計算法をnegative entropy の原因に帰せしむる考えであるが, Matsu-

baraおよびFisch and Harrisはd－次元cubic latticeに対するspin glass susceptibilityの高温展開級数を10次まで求め，T_G附近で発散の傾向が見られないことからqが熱平衡を記述するorder parameterであることに疑問を投げかけている。これらについて進歩が期待される。

計算機実験の現状とこれから

東工大 理　小 野 昱 郎

スピン間の交換相互作用がランダムな磁性体の相転移や熱力学的性質，低温でのスピン配列状態等を調べるために，これまでに行われた計算機実験について報告し，問題点と将来の研究の方向について述べる。

計算機による数値実験には主として次の3つの型があると考えられる。

Ⅰ. Monte Carlo simulation：スピンの確率論的運動から擬似正準集合を作り，物理量の統計平均値を計算する。

Ⅱ. 素励起（スピン波）のスペクトルを調べ，低温での物理量を求める。

Ⅲ. 小さい有限系のスピンの力学的運動を数値的に調べ，無限系へ外挿する。

Ⅰの方法は相転移の研究に有力な方法で，特にイジング・スピン系は多くの研究がある。非磁性イオンによる希薄磁性体や，競合する相互作用の混合磁性体の磁化，エネルギー，比熱，帯磁率，スピン・グラスのオーダ・パラメータの温度変化等が得られている。転移温度付近の臨界指数は一部を除き，信頼できる値は得られていない。微視的状態，つまり低温でのスピン配列状態やスピン対相関，格子構造による特長的な変化も報告する。磁化過程と微視的構造の変化についても述べる。また古典スピン系のシミュレーションについても報告する。

Ⅱの方法はＲＫＫＹ型の相互作用をもつ古典スピン系の基底状態での各サイトの分子場，スピン波の励起スペクトルが調べられている。Ⅲについてはランダム系はまだない。